А. И. Козлов, М. Ю. Кокурин

Марийский государственный университет,

kokurin@marsu.ru, matemanaliz@rambler.ru

ОДИН ПОДХОД К РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЮ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФУНКЦИИ ОТ МАТРИЦЫ

При решении различных классов операторных уравнений возникает необходимость численной аппроксимации аналитических функций от линейных операторов. Такого рода конструкции являются естественной составной частью многих приближенных методов решения задач Коши для операторных дифференциальных уравнений [1, 2]. В типичных случаях $A : D(A) \subset X \to X$ — неограниченный замкнутый оператор, действующий в комплексном банаховом пространстве X, $\overline{D(A)} = X$. Численная реализация соответствующих процедур в X предполагает замену оператора A его конечномерной аппроксимацией $\mathcal{A} \in \mathbf{C}^{N\times N}$.

Следуя [3, с. 483], определим $f(\mathcal{A})$ как матрицу

$$f(\mathcal{A}) = (f_{mj}), \quad f_{mj} = \frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma} f(z) e_m^T (zI - \mathcal{A})^{-1} e_j dz, \qquad (1)$$

где I — единичная матрица, $e_m = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ (единица стоит на m-м месте), а замкнутый контур Γ окружает спектр $\sigma(\mathcal{A})$. Схема (1) допускает простое распараллеливание: достаточно представить интеграл по замкнутому контуру в виде суммы интегралов по конечному числу дуг Γ_k,

$$\Gamma = \bigcup_{k=1}^{K} \Gamma_k.$$

В (1) имеем интеграл от конечномерной вектор-функции, пропорциональной $y_j(z) = (zI - \mathcal{A})^{-1} e_j$. Каждый частичный контур Γ_k делится узлами $z_{k,l} \in \Gamma_k$, $l = 0, \dots, \mathcal{N}$, на $\mathcal{N}$ частей, при этом $z_{k,0}$ и $z_{k,\mathcal{N}}$ являются граничными точками Γ_k. Векторы $y_j(z_{k,l})$ для различных точек $z_{k,l}$ вычислялись методом биортогонализации [4, с. 213]. Данный метод в численных экспериментах оказался чувствителен к выбору начального приближения, поэтому при каждом k вектор $y_j(z_{k,0})$ находился методом Гаусса, далее найденное решение $y_j(z_{k,l})$ выбиралось в качестве начального приближения при вычислении $y_j(z_{k,l+1})$, $l = 0, \ldots, \mathcal{N}-1$. Интегралы по частичным дугам Γ_k допускают приближенное вычисление по выбранной квадратурной формуле с одинаковым числом узлов в результате работы независимых процессов. В расчетах использовались простейшие схемы

$$\int_{\Gamma_k} F(z)dz \approx \sum_{l=0}^{\mathcal{N}-1} F\left(\frac{z_{k,l} + z_{k,l+1}}{2}\right)(z_{k,l+1} - z_{k,l}),$$

$$\int_{\Gamma_k} F(z)dz \approx \sum_{l=0}^{\mathcal{N}-1} F(z_{k,l})(z_{k,l+1} - z_{k,l}), \quad k = 1, \ldots, K.$$

Допускаемая погрешность в обоих случаях эффективно контролируется.

В тестовых расчетах в качестве контура Γ выбиралась окружность радиуса $R = \|\mathcal{A}\| + d$, где $\|\mathcal{A}\|$ — евклидова норма $d > 0$. При увеличении d в матрице $z_{k,l}I - \mathcal{A}$ появлялось диагональное преобладание, что позволяло минимизировать количество итераций при вычислении вектора $y_j(z_{k,l}) = (z_{k,l}I - \mathcal{A})^{-1}e_j$. Однако при достаточно большом R для вычисления интегралов по частичным контурам приходилось выбирать несколько большее число узлов.

Для расчетов использовался четырехъядерный процессор Intel(R) Core(TM) 2 Quad CPU Q6600 @2.40 GHz с памятью 4.00 ГБ, распараллеливание выполнялось с помощью технологии OpenMP. В докладе представлены результаты численных экспериментов с использованием описанной методики вычислений функций от матриц.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 09–01–00273а).

ЛИТЕРАТУРА

1. Иванов В. К., Мельникова И. В., Филинков А. И. *Дифференциально-операторные уравнения и некорректные задачи.* – М.: Наука, 1995. – 176 с.

2. Кокурин М. Ю., Ключев В. В. *Необходимые и достаточные условия квалифицированной сходимости итерационных методов решения нерегулярных уравнений.* – Йошкар-Ола.: Изд-во МарГУ, 2009. – 219 с.

3. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. *Матричные вычисления.* – М.: Мир, 1999. – 548 с.

4. Тыртышников Е. Е. *Методы численного анализа: учебное пособие для вузов.* – М.: Издательский центр "Академия", 2007. – 320 с.